

結晶中におけるトリプチセンの分子間ギア運動を志向した

金(I)錯体の分子設計

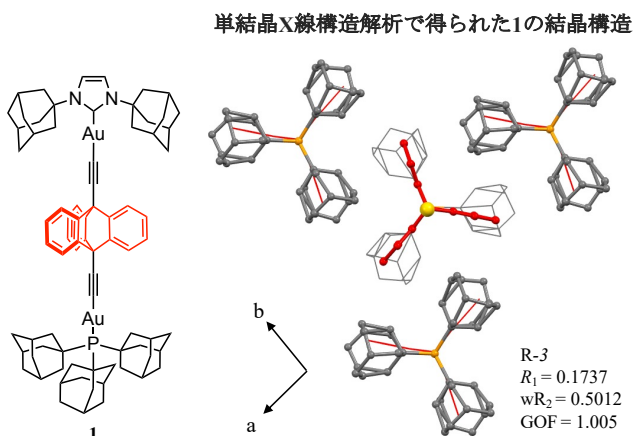
(北大院工¹・北大 WPI ICRReDD²) ○山本 光¹・安藤 廉平¹・陳 旻究^{1,2}・伊藤 肇^{1,2}

Molecular design of Au(I) complex rotor toward inter-molecular correlated rotation of triptycenes in crystal (¹Graduate School of Engineering, Hokkaido University, ²WPI ICRReDD, Hokkaido University) ○Hikaru Yamamoto,¹ Renpei Ando,¹ Mingoo Jin,^{1,2} Hajime Ito^{1,2}

Crystalline molecular gears exhibit correlated molecular rotations in crystalline phase. The crystalline materials have attracted many attention via the high potential of functional molecular machines.[1] However, design of the geared geometry in crystal is still challenging subject due to the difficultness of crystal structure prediction. In addition, the size of rotator is still limited. In this presentation, we will describe the Au(I) complex **1** toward formation of crystalline molecular gear possessing a triptycene as the rotator having a large radius. The developed Au(I) complex **1** has an *N*-heterocyclic carbene (NHC) possessing adamantyl groups and triadamantylphosphine as ligands in both sides. Single crystal XRD analysis revealed that the triptycene moiety and triadamantylphosphine formed a geared geometry as shown below figure. We will also describe the details of the molecular motion of the triptycene moiety using solid-state NMR and computational chemistry methods.

Keywords : Molecular gear; Au(I) complex; Molecular rotor

結晶性分子ギアとは、結晶中で複数の隣り合う分子やその一部が連動してギア運動を示すものをいう。この結晶は固体分子マシンへの応用が期待されているが、その結晶構造の設計は未だ困難であり、また回転部位はフェニレン程度の大きさに止まっている。本発表では、金(I)錯体を用いた回転半径の大きいトリプチセン骨格を回転部位として有する結晶性分子ギアの開発について述べる。トリプチセンを回転部位とする金(I)錯体 **1** は、両端にアダマンチル基を有する *N*-ヘテロ環状カルベン(NHC)とトリアダマンチルホスフィンを両端に配位子として持つ。単結晶 XRD 構造解析によりトリプチセン部位とトリアダマンチルホスフィンが互いに絡み合うギア構造を形成することがわかった。本発表では、固体 NMR や計算化学的手法を用いたトリプチセン部位とその周辺の分子運動の詳細についても紹介する。



1) Liepuoniute, I. Jellen, M. J. Garcia-Garibay, M. A. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 12994.